準結晶の構造について.

筑波大学物理工学系　小川　泰

準結晶については、前回(86年3月)の研究会で紹介を行ったが、発端となったShechtmanらの実験の論文[1]以来、おそらく40編程の論文が出ている。しかし、そのうちの半数はpreprintとして流布されており、日本での情報は1テンポ遅れているのかも知れない。

日本でも、物性研・竹内・木村ら[2]、東北大金研・平賀ら[3]による実験が行われており、私も、幸い、Penrose変換の3次元版を発見することができ[4]、彼らの実験の解釈にも役立っているようである。

従来の結晶学が並進対称性(周期性)を最重視した体系であったのに対して、周期性の代りに、方向秩序や自己相似性をもった秩序をもとり入れた、空間秩序の体系化が必要となっている。　現在、これに応える決定版はないが、高次元結晶の低次元への射影であるとか、数組の平行線群を描いたときに出来る二直線の交点を菱形に置き換える(2次元の場合)とか、いろいろな方法で、かなり普遍的に準結晶状のものを得ることができる。自己相似性は必ずしも必要ではない。

これらの考えは、一般的な体系を念頭において、条件を緩め、このようなものも準結晶的である、と枠を広げる方向の議論といえよう。

一方、高度の対称性をどれだけ共存させうるか、最も理想的な準結晶構造は何かを探る別の方向がありうる。　私が試みたのはこの方向の研究であり、2次元の場合のPenroseの論理を、3次元に適用するために、いわば、立体パズルに挑戦した。

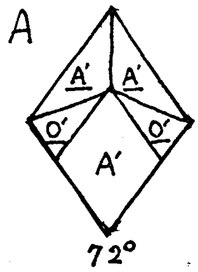
以下、その要点を簡単に紹介する。

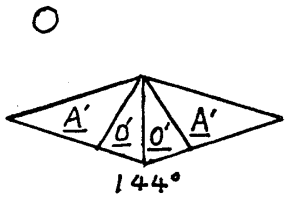
Penroseの論理、Penrose変換.

それらだけを使って空間を埋めつくせるような複数種類の基本図形(タイル)に対して、それらの相似縮小版のみによる絵柄を与える。一枚のタイルの絵柄には縮小図形のはんぱがあってもよいが、タイル貼りの際に必ず完成されなければならない。もしこのような絵柄タイルがあれば、絵柄全体が作り出す紋様は、タイル貼り自体の紋様と共通の性質をもつ。　絵柄の縮小図形がタイルの大きさになるまで拡大すれば、あるタイル貼り構造から、他の、一まわり広い領域のタイル貼り構造への変換になる。　この変換は、各タイルの絵柄で規定されているので、このような性質の絵柄づけをPenrose変換と名づける。　Penrose変換を無限回繰り返せば、一つの極限紋様に収束することがある。この極限紋様をPenrose tilingと呼ぶ。

2次元のタイルは、頂角の一つが72°の菱形A(Acute 鋭角の意)と144°の菱形O(Obtuse 鈍角の意)の二種類である。その縮小版をA', O'とすると、Aは2個分

のA′と1個分のO′で、Oはそれぞれ1個分のA′とO′で絵柄を与える。隣りのタイルと半分ずつ持ちよって1個のA′やO′を完成させる部分もある。



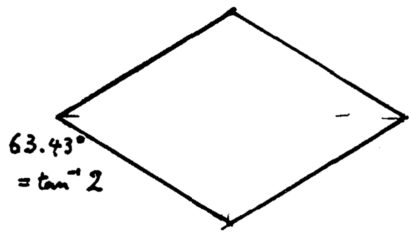


（A′, O′は A′, O′の半分）

左図のA，Oそれぞれの上側の2辺と下側の2辺は、扱いが異っていることに注意する必要がある。この差異のために、はんぱな図形が残らず、全て図形が完成するようにタイル貼りは制限を受ける。

また、2次元の場合には、厳密にいうと紋様は4種子の変化をし、狭い意味での極限図形ではない。しかし、変換の前後の紋様を比較する際に、対応させる点について条件をゆるめるならば、不変な紋様になっている。Fractalの場合に、海岸線のようなものを自己相似と呼ぶ以上に、はるかに高度の（統計的以上に）自己相似になっている。

3次元の場合



3次元タイルは右図の菱形を面にもつ、2種類の平行6面体、A_6とO_6である。

鋭角の頂角が $\tan^{-1}2 = 63.43°$ で、1辺を1としたとき、対角線の長さは、$\sqrt{2+2/\sqrt{5}} = 1.701$ 及び $\sqrt{2-2/\sqrt{5}} = 1.052$ で、これらの比が黄金比 $\tau = (\sqrt{5}+1)/2 = 0.618$ になっている。$\tan^{-1}2$ は、正20面体の12頂点に向けて中心からベクトルを出すときに出来る中心角である。このときできるもう一種類の角はこの角の補角116.57°である。これらの12ベクトルから3本選んだときにできる平行6面体は2種類あり、3つの鋭角頂点のみが1点に会したのがA_6、鈍角頂点が3つ1頂点に会したのがO_6である。このとき、相似比 $\tau^3 = 2+\sqrt{5}$ のPenrose変換が存在する。τ^{-3}の縮小版A_6' O_6'を用いて、A_6は55個分のA_6'と34個分のO_6'、O_6は34個分のA_6'と21個分のO_6'で立体絵柄をつけることができる。

3次元のときの特徴を列挙すると、

1) 基本骨格のみ一義的に決定するが、それ以外の部分には自由度が残る。この自由度は、対称性の余りよくない内部構造を持ちながらも外観の対称性が高い局所部分が存在することと、2)の性質とも関連する。

2) A_6もO_6も、どの面も共通の基本骨格をもつ。これは、2次元の場合のようなタイル貼りについての制約がないことを意味し、どの面とどの面も合わせることができる。

3) 各頂点は、A_6の鋭角頂点のみが20個集った構造になっている。

O_6 の対角線は $\sqrt{3-6/\sqrt{5}} = 0.563$ で、かなり短い。各頂点にのみ粒子がいて、粒子間隔が1であるとすれば許されない距離である。しかし、幸いにも、Al-Mn 合金の組成比は、Mn がほぼ 20 at.% である。A_6 は Al_4Mn、O_6 は Al_3Mn で、A_6 と O_6 の混合比が黄金比、つまり $\tau^{-1}:\tau^{-2} = 0.618 : 0.382$ とすると、21.7% になる。このとき、平行6面体頂点に Mn があり、稜や細胞内に Al がいるので、Mn 間距離としては 0.563 は短くても、Al-Mn の間隔と比して無理はない。
構造をも含めて実験との比較は現在のところない。仮に Al-Mn 系がこの構造でないとしても、一番理想的な準結晶構造と考えられる。

Bloch 定理や、Bragg-Laue 反射を考えても、現在の固体論は周期性を前提とし過ぎている。今後、周期性を前提としない記述が必要となることは間違いない。
周期性をもたずに、長距離の方向秩序や自己相似性をもつ場合について、Bloch 定理に代る波の一般論や、このような秩序へ移行する際に、Goldstone mode に代るものは何か？など興味深い問題が多い。問題は当然、形や構造の問題だけではない。しかし、形や構造を抜きにして解決しえないことも明らかである。

1) D. Shechtman et al. Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 1951.
2) K. Kimura et al. J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3217.
3) K. Hiraga et al. Sci. Rep. RITU. 32 (1985) 309. J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 4077.
4) T. Ogawa, J. Phys. Soc. Jpn. 54 (1985) 3205.

なお、3次元 Penrose 格子の解説は、数学セミナー 86年1.2月号連載、及び日本金属学会報 86年2月号に書いた(小川)。準結晶についての解説は、固体物理 20 (1985) 897 (木村・竹内)、日本物理学会誌 40 (1985) 961 (竹内)、物性研究掲載予定(「液体の構造と電子物性」研究会報告)(木村・竹内)、日本金属学会報 1986年2月号に特集、などがある。

この機会に昨年の報告のミスを訂正しておきたい。(物性研究 44 (1985) no.4, 号末 p.22)
p.21 ↑4 「同じ菱形 A, O」 ⟶ 「対角線の長さの比が黄金比の菱形」
図 2a A と O が反対になっている。
図 2b. Dart と Kite が反対になっている。